

Волны кристаллизации в пылевой плазме

Б. А. Клумов¹), М. Рубин-Зуич, Г. Е. Морфилл

Max-Planck-Institut für Extraterrestrische Physik, D-85740 Garching, Germany

Поступила в редакцию 23 августа 2006 г.

После переработки 10 октября 2006 г.

Численно исследуются волны кристаллизации в пылевой компоненте комплексной плазмы, которые недавно наблюдались экспериментально. С использованием метода молекулярной динамики проведено численное моделирование эволюции системы заряженных микрочастиц, взаимодействующих посредством экранированного кулоновского потенциала (потенциала Юкавы). Показано, что процесс формирования и распространения волны кристаллизации в такой системе является существенно трехмерным. Анализ локальной структуры пылевых частиц за фронтом волны кристаллизации обнаруживает сосуществование различных типов кристаллической решетки, включая метастабильную фазу, то есть неравновесный фазовый переход.

PACS: 67.57.Lm, 76.60.–k

В последние годы резко вырос интерес к процессам, происходящим в плазме, содержащей микрочастицы. Такую плазму принято называть комплексной (complex plasmas) или пылевой (dusty plasmas) плазмой [1–4]. Интерес к комплексной плазме обусловлен, с одной стороны, ее широкой распространенностью в природе. Межзвездные облака, газопылевые скопления, планетные кольца [5], атмосферы комет, ионосферы [6] и магнитосферы планет (например, в ионосфере Земли – это серебристые облака [7]) – все эти объекты в той или иной степени являются комплексной плазмой. С другой стороны, возможность наблюдения за поведением каждой отдельной микрочастицы дает описание свойств ансамбля пылевых частиц на самом подробном, кинетическом уровне. Это делает пылевую плазму привлекательным инструментом для изучения различных фундаментальных проблем физики, например, для изучения фазовых переходов [8], для понимания природы гидродинамических неустойчивостей [9] и др.

В лабораторных условиях пылевую плазму обычно получают при добавлении микрочастиц в слабоионизованную газоразрядную плазму инертных газов пониженного давления. Рекомбинация электронов и ионов на поверхности пылевых частиц приводит к их быстрой зарядке, величина заряда зависит от размера частицы и параметров плазмы, например, для типичного радиочастотного разряда в аргоне частица размером 1 мкм приобретает заряд $Z_d \sim 10^3$ зарядов электрона. Такой высокий заряд микрочастицы часто приводит к сильной неидеальности пылевой компоненты, которая может находиться в широ-

ком диапазоне фазовых состояний: проявлять себя как газ, жидкость или кристалл. Кристаллическое состояние пылевой компоненты комплексной плазмы (так называемый плазменный кристалл) было экспериментально открыто в 1994 г. [10, 11], а предсказано теоретически еще в 1986 г. [12]. Несмотря на это, волны кристаллизации (ВК) в комплексной плазме были обнаружены экспериментально только совсем недавно [13].

Эксперименты, в которых наблюдалась ВК, проводились следующим образом: первоначально в плазме радиочастотного разряда в аргоне (при давлении $p \simeq 0.23$ мбар и частоте 13.6 МГц) был создан протяженный плазменный кристалл, состоящий примерно из 10 миллионов полимерных микрочастиц размером примерно 1.3 мкм (со средним межчастичным расстоянием $\Delta \simeq 80$ мкм).

Резким уменьшением мощности разряда (с последующим резким увеличением до начальной величины) плазменный кристалл был расплавлен. Падение мощности, по-видимому, привело к уменьшению заряда микрочастиц Z_d и, соответственно, к уменьшению параметра неидеальности пылевой плазмы Γ (определяемому как отношение потенциальной энергии электростатического взаимодействия между соседними частицами к их температуре: $\Gamma \propto Z_d^2$), переводя пылевую компоненту из сильно- в слабо-связанное состояние. Последующий процесс рекристаллизации пылевой компоненты был зарегистрирован с помощью видеокамеры высокого разрешения (1028×772 пикселей, 15 кадров/с).

Рекристаллизация в такой системе, как было обнаружено, носит волновой характер: кристаллизация начинается с нижней границы расплавленного

¹)e-mail: klumov@mpe.mpg.de

кристалла и имеет вид волны с ярко выраженным фронтом, которая распространяется вверх, в направлении, противоположном силе тяжести. На рис.1 представлены синтетические кадры (полученные на-

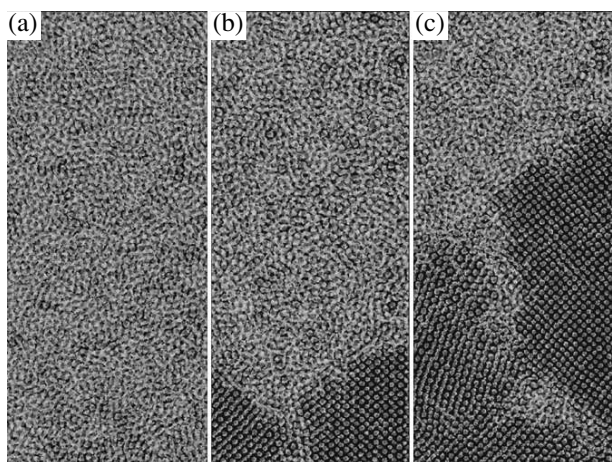


рис.1. Волна кристаллизации в пылевой плазме в разные моменты времени ((a), (b), (c) соответствуют моментам времени $t = 0, 10, 25$ с после начала рекристаллизации, соответственно). Приведены синтетические фотографии (полученные наложением 10 последовательных кадров), демонстрирующие эволюцию волны кристаллизации, распространяющейся через плазменный кристалл. В начальный момент времени пылевая компонента находится в неупорядоченном состоянии (кристалл расплавлен). В процессе кристаллизации системы формируется волна порядка (кристаллизации), бегущая снизу вверх и имеющая ярко выраженный фронт, ширина которого порядка межчастичного расстояния. Видно, что пылевые частицы за фронтом ВК образуют две области с различной структурой. Такие синтетические фотографии ВК фактически показывают и поле относительной температуры микрочастиц, видно, что за фронтом ВК температура частиц заметно ниже

ложением 10 последовательных кадров), которые демонстрируют распространение ВК в указанной системе в разные моменты времени. Хорошо видна граница между кристаллической и жидкой фазами, причем характерная толщина фронта – порядка межчастичного расстояния. Характерная скорость распространения фронта $v_{cf} \simeq 100$ мкм/с, что соответствует формированию примерно одного упорядоченного слоя частиц в секунду. По мере распространения волны кристаллизации скорость фронта незначительно уменьшается. Отметим, что среднее межчастичное расстояние $\Delta \simeq 80$ мкм и слабо зависит от вида фазы.

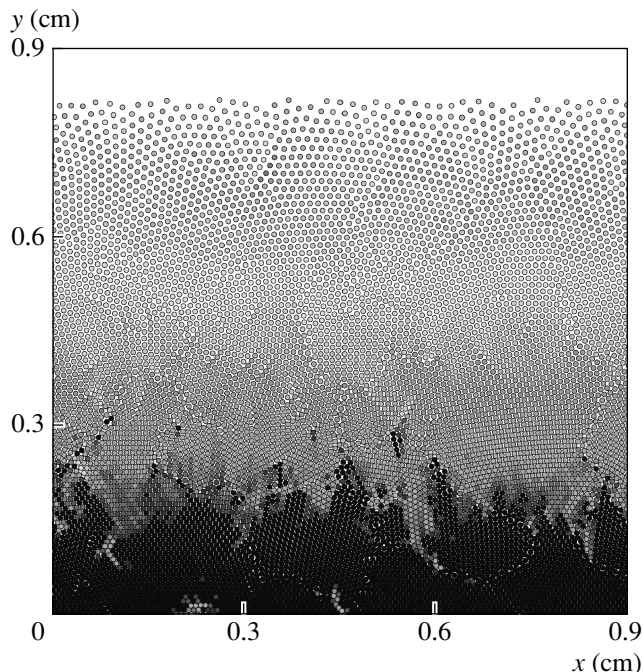


рис.2. Рекристаллизация в двумерной системе Юкавы. Представлено поле температур и положение микрочастиц в определенный момент времени после начала рекристаллизации. Более темному цвету соответствует более низкая температура микрочастиц

Необходимо отметить сложную, фрактальную структуру фронта ВК, с минимальным масштабом неоднородности $\simeq \Delta$. В процессе распространения ВК мелкие неоднородности на фронте волны исчезают – происходит их слияние (коалесценция) с образованием неоднородностей больших масштабов. Важно отметить, что рис.1 фактически демонстрирует и поле относительной температуры микрочастиц: в области за фронтом ВК их температура заметно ниже. Из покадрового анализа движения микрочастиц можно оценить отношение температур T_{liq}, T_{cr} перед и за фронтом волны кристаллизации: $T_{liq}/T_{cr} \simeq 2$ [14]. Приведенные экспериментальные результаты демонстрируют на кинетическом уровне, как распространяется волна кристаллизации в пылевой плазме [13].

В настоящей работе делается попытка численно воспроизвести наблюдательные данные, моделируя поведение ансамбля микрочастиц методом молекулярной динамики (МД). Для простоты считается, что все микрочастицы имеют фиксированный заряд $Z_d/e \sim 3 \cdot 10^3$, где e – заряд электрона, а парное взаимодействие пылевых частиц описывается экранированным кулоновским потенциалом (потенциалом Юкавы) [15]: $\phi(r) = Z_d/r \exp(-r/\lambda_D)$, где

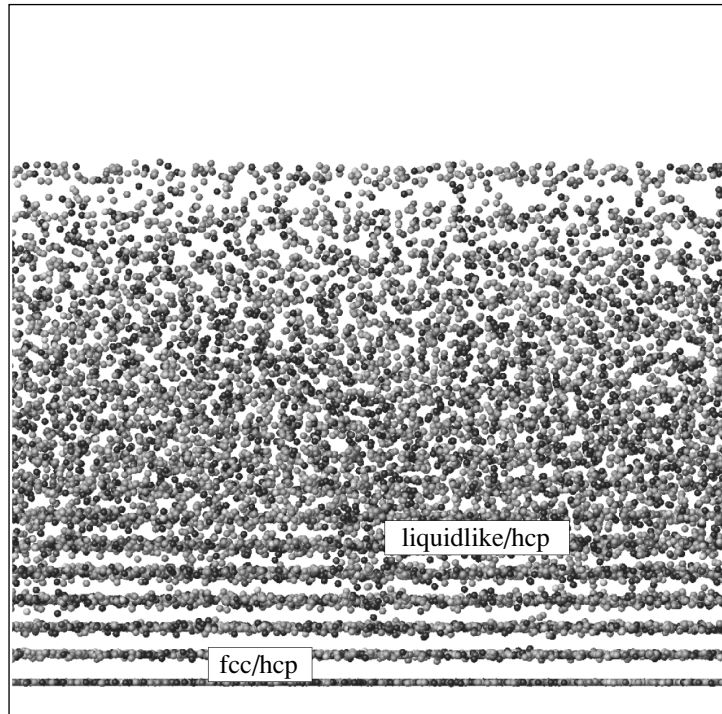


Рис.3. Волна кристаллизации в трехмерной системе Юкавы. Представлено поле температур и положение микрочастиц в определенный момент времени после плавления плазменного кристалла. Более темному цвету соответствует более низкая температура микрочастиц. Определен локальный порядок в такой системе перед/за фронтом волны кристаллизации (см. текст). Видно сосуществование различных типов кристаллической решетки, включая метастабильную фазу (hcp)

λ_D – длина экранирования (в экспериментах с комплексной плазмой λ_D обычно порядка межчастичного расстояния Δ). Остальные параметры пылевой плазмы (размер микрочастицы, плотность буферного газа и др.) такие же, как и в эксперименте. Отметим, что характерное время зарядки микрочастицы в условиях данного эксперимента ($\tau_{ch} \sim 10^{-4}$ с) мало по сравнению с характерным временем распространения фронта кристаллизации ($\tau_{cf} \sim 1$ с), а нагрев микрочастиц за счет вариации их заряда во времени/пространстве [16] несущественен на рассматриваемых временах ($\tau \sim 100$ с) и параметрах плазмы, поэтому приближение фиксированного заряда при моделировании представляется оправданным. Несмотря на модельность, МД расчеты, как мы покажем ниже, позволяют на количественном уровне описать результаты эксперимента.

Уравнения движения:

$$m\ddot{\mathbf{x}}_i = -Z_d \sum \nabla\phi - m\gamma\dot{\mathbf{x}}_i - m\mathbf{g} + \mathbf{L}_i \quad (1)$$

решались для N микрочастиц в 1D (линейная цепочка частиц), 2D (плоский монослой) и 3D (облако пылевых частиц) геометриях. Слагаемые в правой части (1), помимо электростатического взаимодействия

частиц, описывают торможение пылевых частиц при их столкновениях с нейтральными атомами и молекулами буферного газа, эффективную силу тяжести²⁾ и случайную силу \mathbf{L}_i Ланжевена (тепловой шум, индуцированный нейтральными частицами), определяемую из $\langle \mathbf{L}_i(t)\mathbf{L}_j(t+\tau) \rangle = 2\gamma m k_B T \delta_{ij} \delta(\tau)$ при условии $\langle \mathbf{L}_i(t) \rangle = 0$.

Нижняя граница расчетной области являлась потенциальной стеной и моделировала нижнюю приэлектродную область разряда, верхняя граница – свободная. В 2D и 3D геометриях использовались периодические граничные условия на боковых краях. В начальный момент времени, микрочастицы, находящиеся в предварительно созданном кристаллическом состоянии, были мгновенно нагреты и плазменный кристалл быстро расплавился. Некоторые результаты МД моделирования последующей рекристаллизации системы пылевых частиц приведены ниже.

²⁾Электрическое поле в приэлектродной области рассматриваемого ВЧ разряда направлено против силы тяжести, поэтому суммарная объемная сила, действующая на микрочастицы (эффективная сила тяжести), может быть заметно меньше, чем сила тяжести (см., например, [17]).

На рис.2 представлено положение $N = 900$ частиц и их энергия в определенный момент времени для 2D плазменного кристалла. Видно формирование волны охлаждения частиц, которая имеет сложную, фрактальную структуру и распространяется снизу вверх. Такая (2D) система быстро кристаллизуется, причем кристаллизация микрочастиц носит объемный характер, а не волновой³⁾. Тем не менее, ряд особенностей эксперимента такое моделирование воспроизводит хорошо, а именно, волну охлаждения и ее структуру, седиментацию частиц в процессе кристаллизации и гравитационное сжатие плазменного кристалла. На рис.3 показана на-

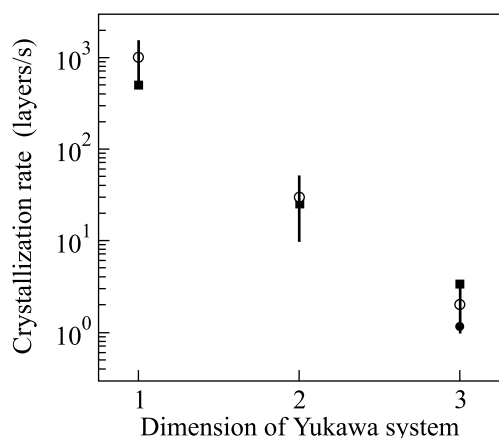


Рис.4. Зависимость скорости волны кристаллизации от размерности системы Юкавы по результатам МД моделирования (светлый кружок) и эксперимента (черный кружок). Также представлена зависимость $\exp(-N_{\text{nnb}})$, где $N_{\text{nnb}} = 2, 6, 12$ для 1D, 2D и 3D геометрии (черный квадрат), соответственно

чальная стадия формирования волны кристаллизации по результатам 3D МД ($N=27000$) моделирования. В этом случае скорость ВК близка к экспериментальным значениям и слабо зависит от длины экранирования и эффективной силы тяжести. На рис.4 демонстрируется зависимость скорости волны кристаллизации от размерности (1D, 2D, 3D) рассматриваемой системы микрочастиц. Сильное падение скорости ВК с ростом размерности плазменного кристалла можно объяснить увеличением числа ближайших соседей N_{nnb} , с которыми взаимодействует каждая отдельная микрочастица. Действительно, обычно в экспериментах с комплексной плазмой $\lambda_D/\Delta \leq 1$, поэтому вклад далеких ($r \geq \Delta$) взаимодействий экспоненциально мал. Для линейной це-

почки частиц, очевидно, $N_{\text{nnb}} = 2$, для 2D системы $N_{\text{nnb}} \simeq 6$ ($N_{\text{nnb}} = 6$ для идеального 2D плазменного кристалла, имеющего гексагональный тип решетки), в случае 3D – $N_{\text{nnb}} \simeq 12$ (для идеальных fcc и hcp (гранецентрированная и гексагональная плотноупакованные кубические решетки) $N_{\text{nnb}} = 12$, для bcc (объемноцентрированная кубическая решетка) число ближайших соседей $N_{\text{nnb}} = 8$). Из термодинамических представлений понятно, что при формировании упорядоченной структуры из N элементов возможны $N_c \propto \exp(N_{\text{nnb}})$ комбинаций, поэтому следует ожидать, что скорость фронта ВК $v_{\text{cf}} \propto \exp(-N_{\text{nnb}})$. На рис.4 представлена также зависимость $\exp(-N_{\text{nnb}})$, которая хорошо воспроизводит результаты МД моделирования.

Отметим, что в настоящих МД расчетах одним из ключевых параметров является величина среднего межчастичного расстояния Δ , которая зависит от заряда микрочастиц, их плотности, эффективной силы тяжести, и которая определяется в результате моделирования. Это дает возможность, зная скорость распространения волны кристаллизации и межчастичное расстояние Δ , оценить заряд Z_d микрочастиц. Для указанного эксперимента $Z_d/e \simeq (3 \div 5) \cdot 10^3$.

Результаты 3D МД моделирования позволяют определить очень важную характеристику процесса кристаллизации – локальную структуру (local order) пылевых частиц за фронтом ВК. К сожалению, в рассмотренном эксперименте [13] такая информация не была получена.

Известно, что система частиц, взаимодействующих посредством потенциала Юкавы, в термодинамическом пределе, в зависимости от параметра неидеальности Γ и структурного параметра $\kappa \equiv \Delta/\lambda_D$, может иметь только два типа кристаллической решетки: fcc и bcc (см., например, [8]). В эксперименте [19] дополнительно к fcc/bcc типам решетки, наблюдалась также и hcp-фаза. Отметим, что наличие анизотропии в потенциале межчастичного взаимодействия (которая всегда есть в приэлектродной области ВЧ разряда из-за анизотропии ионного потока), диполь-дипольное взаимодействие микрочастиц, наличие гравитации и др. приводят к значительно более сложной фазовой диаграмме, чем в системе Юкавы: кристаллическая решетка перестает быть только кубической ($a = b = c$): появляются фазы bct ($a = b \neq c$), bco ($a \neq b, c \neq a, c \neq b$), hcp и струнная (string), когда пылевые частицы выстраиваются в линию (см., например, [20]). Другим возможным объяснением существования hcp-фазы в [19] является неравновесность системы пылевых частиц, в этом

³⁾ В недавних экспериментах по плавлению 2D плазменного кристалла ударной волной [18] рекристаллизация пылевой компоненты также носила объемный характер.

случае hcp-кластеры исчезают при $t \rightarrow \infty$ стремлении системы к равновесию.

Для того чтобы определить тип локальной кристаллической структуры, используется так называемый метод определения параметров локального порядка (bond order parameter method), предложенный в [21]. Сначала для каждой i -й частицы определяются ближайшие соседи $N_b(i)$, для этого обычно используется метод ячеек Вороного (Voronoi cell). Затем для каждой частицы конструируются усредненные по ближайшим соседям параметры порядка (local bond order parameters) $q_{lm}(i)$:

$$q_{lm}(i) = \frac{1}{N_b(i)} \sum_{j=1}^{N_b(i)} Y_{lm}(r_{ij}), \quad (2)$$

где Y_{lm} – сферические гармоники, r_i – координаты i -й частицы, $r_{ij} = r_j - r_i$. Величина $q_{lm}(i)$ зависит от выбора системы координат, поэтому вычисляются вращательные инварианты $q_{lm}(i)$ второго, $q_l(i)$, и третьего, $w_l(i)$, родов:

$$q_l(i) = \left(\frac{4\pi}{(2l+1)} \sum_{m=-l}^{m=l} |q_{lm}(i)|^2 \right)^{1/2}, \quad (3)$$

$$w_l(i) = \sum_{\substack{m_1, m_2, m_3 \\ m_1 + m_2 + m_3 = 0}} \begin{pmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} q_{lm_1}(i) q_{lm_2}(i) q_{lm_3}(i), \quad (4)$$

где $\begin{pmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ – вигнеровские $3j$ -символы, в последнем уравнении суммирование производится по всем индексам $m_i = -l, \dots, l$, которые удовлетворяют условию: $m_1 + m_2 + m_3 = 0$. Для идентификации кристаллической структуры обычно используют q_4 , q_6 и w_6 , значения которых для идеальных кристаллов fcc/bcc/hcp легко вычисляются: $q_4^{\text{fcc}} = 0.191$, $q_4^{\text{bcc}} = 0.036$, $q_4^{\text{hcp}} = 0.097$, $q_6^{\text{fcc}} = 0.575$, $q_6^{\text{bcc}} = 0.511$, $q_6^{\text{hcp}} = 0.485$, $w_6^{\text{fcc}} = -0.013$, $w_6^{\text{bcc}} = 0.013$, $w_6^{\text{hcp}} = -0.012$. Считается, что частица находится в кристаллическом состоянии, если $\eta \equiv (\delta q_4^2 + \delta q_6^2 + \delta w_6^2)^{1/2} \leq 0.1$, где $\delta q_i = q_i/q_i^{\text{perfect}} - 1$ – относительное изменение рассматриваемого инварианта по сравнению со случаем идеального кристалла (fcc, hcp). Здесь мы не идентифицируем bcc-фазу, наличие и поведение которой в процессе рекристаллизации пылевой системы будет рассмотрено в последующих публикациях. В случае $\eta \geq 0.1$ считается, что частица находится в жидком состоянии (liquidlike).

На рис.3 показан рассчитанный локальный порядок в системе Юкавы перед/за фронтом волны кристаллизации в определенный момент времени. Перед фронтом ВК частицы находятся в жидком состоянии, за фронтом наблюдаются по крайней мере два типа кристаллической решетки – fcc и hcp, причем метастабильная hcp-фаза в начальные моменты времени ($t \sim 3\tau$) после кристаллизации заметно превалирует над fcc, что указывает на сильную неравновесность пылевой системы.

В настоящей работе методом молекулярной динамики исследовалось поведение ансамбля заряженных микрочастиц, межчастичное взаимодействие между которыми описывается потенциалом Юкавы. Использовались параметры микрочастиц и комплексной плазмы, близкие к экспериментальным. Были рассмотрены системы частиц в 1D (одномерная цепочка частиц), 2D (плоский монослой) и 3D геометриях. В 3D случае определена локальная структура пылевых частиц, находящихся перед/за фронтом ВК. Обнаружено сосуществование различных типов кристаллической решетки за фронтом ВК (fcc, bcc, hcp), включая метастабильную фазу (hcp), что означает наличие сильной неравновесности за фронтом ВК.

Несмотря на то, что результаты 2D моделирования находятся в качественном согласии с экспериментом, в частности, воспроизводят поле температур микрочастиц, резкий температурный фронт, волну охлаждения частиц, бегущую снизу вверх, и показывают сложную структуру фронта ВК, в количественном согласии со скоростью распространения ВК находятся только результаты 3D моделирования. Визуализация пылевых частиц в экспериментах с комплексной плазмой, как правило, проводится в 2D геометрии (side view image). Результаты настоящей работы позволяют сделать важный вывод – в экспериментах с пылевой плазмой влияние реальной геометрии объекта может быть определяющим.

1. В. Н. Цытович, УФН **167**, 57 (1997).
2. P. K. Shukla and A. A. Mamun, Introduction to Dusty Plasmas Physics, IOP, 2002.
3. В. Е. Фортвов и др., УФН **174**, 495 (2004).
4. S. V. Vladimirov and K. Ostrikov, Phys. Rep. **393**, 175 (2004).
5. M. Horanyi et al., Rev. Geophys. **42**, RG4002 (2004).
6. В. А. Клумов, S. I. Popel, and G. E. Morfill, JETP **100**, 152 (2005).
7. В. А. Клумов, S. V. Vladimirov, and G. E. Morfill, JETP Lett. **82**, 632 (2005).
8. V. E. Fortov et al., Phys. Rep. **421**, 1 (2005).
9. G. E. Morfill et al, Phys. Rev. Lett. **92**, 175004 (2004).

10. J. H. Chu, L. I., Phys. Rev. Lett. **72**, 4009 (1994).
11. H. Thomas et al., Phys. Rev. Lett. **73**, 652 (1994).
12. H. Ikezi, Phys. Fluids **29**, 1764 (1986).
13. M. Rubin-Zuzic et al., Nature Physics **2**, 181 (2006).
14. M. Rubin-Zuzic et al., Proc. of ICPDP4, 2005.
15. U. Konopka, G. Morfill, and L. Ratke, Phys. Rev. Lett. **84**, 891 (2000).
16. A. V. Ivlev et al., Phys. Plasmas **12**, 092104 (2005).
17. B. A. Klumov, A. V. Ivlev, and G. Morfill, JETP Letters **78**, 300 (2003).
18. D. Samsonov et al., Phys. Rev. Lett. **92**, 255004 (2004).
19. M. Zuzic et al., Phys. Rev. Lett. **85**, 4064 (2000).
20. A. P. Hynninen and M. Dijkstra, Phys. Rev. E **72**, 051402 (2005).
21. P. J. Steinhardt, D. R. Nelson, and M. Ronchetti, Phys. Rev. Lett. **47**, 1297 (1981); Phys. Rev. B **28**, 784 (1983).